ML model xTB-sTDAxTB-ML-20k xTB-ML-300k xTB-ML-20k xTB-ML-300k xTB-sTDA xTB-ML-20k xTB-ML-300k xTB-ML-20k xTB-ML-300k S_1 Class $1 T_1$ Class $1 S_1$ Class $1 S_1$ Class 2 S_1 Class 2 S_1 T_1 Class $1 T_1$ Class 2 T_1 Class 2 T₁ MOPSSAM (143) 0.26 0.17 0.16 0.11 0.11 0.59 0.17 0.13 0.10 0.08 MOPSSAM (1k) 0.20 0.17 0.16 0.15 0.39 0.19 0.12 0.14 0.15 0.14

0.28

MAE (eV)

0.40

0.13

0.19

1.15

0.15

0.22

1.03

0.38

0.29

0.99

0.60

0.26

1.06

0.29 Verde (1.5k) 0.41 0.30 0.26 0.32 0.48 PCQC AL (200k) 0.56 1.22 0.42 0.28 0.33 0.20 0.08 1.22

0.43

0.20

set

INDT (10k)

0.35

0.13